

分子の可視化のためのインタラクションデザインへ向けて： オペレーションプリミティブとデバイスの調和性

中小路久美代¹ 佐藤寛子²

¹東京大学先端科学技術研究センター

²国立情報学研究所

本研究は、分子科学者が分子構造をもとに分子の性質や化学反応性などについて考察する際の、三次元分子モデルの表現系と操作系について、その役割と、必要となるインタラクションデザインの要件についての理論的考察、モデル構築、およびそれに基づくプロトタイピングを目的としたものである。本稿では、われわれがこれまでにおこなってきたナレッジインタラクションデザインの考え方に基づき構築した、オペレーション、インストルメント、デバイス、という三つの要素からなるモデルを説明する。次いで、分子モデルの三次元表現とその操作に必要なインタラクションデザインの要件について、オペレーションプリミティブを同定し、それらのプリミティブと7種のデバイスとの調和性を調査した結果を報告する。

Toward Interaction Design for Molecular Visualization: Matching Operation Primitives with Devices

Kumiyo Nakakoji¹ Hiroko Satoh²

¹RCAST, University of Tokyo

²National Institute of Informatics

The goal of our project is to develop a theoretical framework, construct a model, and prototype tools for chemists to interact with a 3D molecular model while engaging in understanding characteristics of the molecule and predicting molecular reactions. Based on the knowledge interaction design framework we have developed, this paper presents a triad model, which consists of operation, software instrument, and device. We have identified operation primitives for chemists interacting with a 3D molecular model, and conducted user studies to observe how those operation primitives match with seven types of devices.

1 はじめに

本研究のゴールは、化学分野の研究における問題解決に実践的に利用できるインタラクティブシステムの設計およびプロトタイピングと、その基盤となる理論およびモデルの構築である。

化学分野においては、直接見ることのできない物質や現象を分子レベルで解明するための考察や理解の手段として、様々な視覚的表現法が考案され利用されて

いる。化学構造式やプラスチック分子模型、分子軌道図などはその代表例であり、思考や情報伝達のための不可欠な手段として用いられている。近年では、これらをコンピュータで可視化する種々のグラフィックシステムも開発され、研究や教育の現場で広く利用されている。

こうしたコンピュータグラフィックスによる可視化技術は、思考するための手段というよりは、むしろ、結果の確認

やプレゼンテーション, 研究者間のコミュニケーションのために主に利用されており, 分子構造の性質や反応性, 物性等を考察する際に用いられる思考手段としては, 化学構造式やプラスチック分子模型が圧倒的な支持を占めている [中小路, 佐藤 et al. 2003].

コンピュータグラフィックスによる可視化が, 化学者の思考ツールとしても用いられるものとするためには, 従来の分子可視化に加えて, HCI 的な観点も取り入れた技術フェーズの転換が必要であろう. これを目的として我々は, インタラクティブシステムとしての観点からそれらの表現・操作系を構築するといった「化学者を中心とした」アプローチを組み合わせる必要があると考えた.

本論では, 分子の三次元構造をもとに立体化学や構造特性, それらに基づく反応選択性などについて考察するタスクを課題として取り上げている. われわれがこれまでにおこなってきたナレッジインタラクションデザインの考え方 [中小路, 山本 2004] に基づき, 化学者の思考の流れを阻害しないようなインタラクションの系の構築を目的として, オペレーション, インストルメント, デバイス, という三つの要素からなるモデルを構築した. そして, 分子モデルの三次元表現とその操作に必要なインタラクションデザインの要件について, プリミティブを同定し, そのプリミティブと「相性のよい」デバイスを調査した. 本調査は, 三次元分子モデル可視化システムのインタラクションデザイン時に, デザイン要因の優先順位づけをおこなう際の目安として使用すべきデータとしての利用を目的としたものである.

本稿ではまず, 我々が構築したインタラクションデザインの枠組みとそれに基づくモデルについて説明をおこなう. 3章では, その枠組みに基づいて, 分子可視化システムにおける, 三次元オブジェクト操作のプリミティブについて説明する. 4章では, 同定されたオペレーションプリミティブと, 7種の入力デバイスとの調和性の評価を目的として実施した実験とその結果について述べ, 5章で本稿を結ぶ.

2 インタラクションデザインの枠組みとモデル

本章では, 分子可視化におけるインタラクションデザインの枠組みと, そのためのモデルについて説明をおこなう.

本研究では, 三次元分子構造モデルを可視化対象として着目する. 三次元分子構造モデルの操作にあたっては, 下記の三つの側面について考慮する必要がある.

- (1) 化学者が, 三次元分子モデルに対しておこなう典型的な操作
- (2) ソフトウェアシステムが三次元オブジェクトの操作のために提供するインタフェース
- (3) 化学者が直接操作するデバイスインタフェース

化学者が, 表示された三次元分子構造やプラスチック分子模型を操作する方法は, その目的によって多様に異なる. しかしながら共通していることは, 表示された三次元分子構造モデルに対して, 必ずしも操作の完全な自由度を求めている訳ではない点である. すなわち, むしろ, 化学的, 物理的に理に適った制約を伴う操作のいくつかのパターンを, 随意におこなえることが重要であるといえる. 例えば, プラスチック分子模型の操作においては, 分子模型を保持する一方の手を操作の基点として, 模型を結合軸に沿って回転させたり, 結合軸を含む平面の裏側を覗いたりしながら, もう一方の手で微妙な模型の調整をおこない, 頭を動かしつつ, 覗きたい側面から分子模型を眺めるのが一般的なひとつのパターンである [中小路, 佐藤 et al. 2003]. ここで, 回転軸の裏側の様子と比較する際には, 分子模型を保持している方の手で回転操作とそれを戻す操作とを非常に素早く繰り返しおこなう.

このように, 化学者にとって重要な, 三次元分子モデルに対しておこなういくつかの操作のパターンを同定することが, 化学者の思考の流れを阻害しないようなインタラクションデザインに必須であると考えられる.

化学者が, コンピュータにより表示された三次元分子モデルを操作するにあたっては, 化学者と実際に表現されたモデルとの間に, ソフトウェアとデバイスという二種類のインタフェースが介在する.

ソフトウェアインタフェースとは, 表示された三次元オブジェクトを操作するためにシステムが提供する, ブラウザやビューアといった GUI ウィジェットを指す. たとえば三次元オブジェクトの操作をするためには, ダイアルやバーを用いて視点を移動する方法, オブジェクトを直接ドラッグして回転させる方法など様々な手法が存在する. どの手法が最も化学者にとって適しているかは, 上述した化学者がおこないたい操作のパターンと, 下に説明するどのようなデバイスが利用できるか, という両者に依存する.

デバイスインタフェースとは, 一般的なマウス, キーボード, タッチパネル, スティックポインタ, 三次元操作マウス, といった, 種々のデバイスを指す. どのデバイスが, どの操作パターンに適しているかは, 間に介在するソ

ソフトウェアインタフェースに依存する。

このように、化学者にとって、より直感的な、思考の流れを阻害しないような表現と操作の系とをデザインするためには、どのような操作をしたいか、どのようなソフトウェアインタフェースを介在させるのか、どのようなデバイスを利用するのか、という、相互に依存する三つの要因の関係性を明らかにする必要がある。

そこで本研究では、三次元オブジェクトを知的創造作業において操作し吟味するインタラクションを、(A)オペレーション、(B)ソフトウェアインストルメント、および(C)デバイス、という三つの要素からなるモデルで捉えることとした(図 1)。

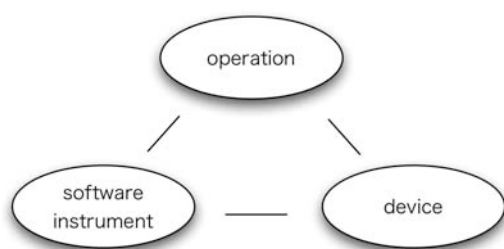


図 1: インタラクションデザインの三要素

オペレーション要素では、表示されている三次元オブジェクト、すなわち三次元分子構造に対して、化学者がどのような基本的な操作をおこなうかのプリミティブを同定する。ソフトウェアインストルメント要素は、三次元オブジェクトの操作のためにソフトウェアが提供する「道具 (instrument)」を表す [Beaudouin-Lafon 2000][Beaudouin-Lafon 2004]。たとえば、オブジェクトの回転を、ビューアが提供するバーをドラッグすることでおこなうのか、オブジェクトを「つかんで」直接的にドラッグするのかによって、ユーザにかかる認知的、物理的負荷が変化する。デバイス要素は、ユーザが直接的に操作する物理的な入力デバイスを表す。マウスや、タッチパネル、ペン入力、など、異なるデバイスによって、ユーザがおこないやすい操作、おこないにくい操作が異なる。

本研究では、これら三つの要素それぞれのプリミティブを同定し、その間の **matching** (調和度)を考慮することにより、インタラクションデザインを進めるものとする。その端緒として本稿では、オペレーションとデバイスとの間の調和度を調査した結果を報告するものである。デバイスとソフトウェアインストルメントの調和度、そしてソフトウェアインストルメントとオペレーションとの調和度を調査した後、三次元分子構造のためのインタラクション環境を総合的にデザインすることが、本研究のゴールである。

次章では、調査に使用したオペレーションプリミティブについて説明し、続く 4 章で調和度調査実験について説明する。

3 オペレーションプリミティブの同定

本章では、化学における分子可視化システムのための、三次元オブジェクトのオペレーションプリミティブの同定について説明をおこなう。

市販されている分子可視化アプリケーションシステムを化学者が扱う際には、下記のような操作が基本としておこなわれる。これらは、プラスチック素材の分子模型を扱う際にも同様におこなわれる一般的な基本操作である。

- (1) 着目する部位と、その部位の周辺の構造環境を観測するために、着目する部位が大きく正面に表示されるように、拡大したり回転したりする。
- (2) 分子内の各部位の空間的な位置関係を観察・解析する過程においては、ある基準面を自分で定めて、その基準面に対して構造がどうなっているかを観測するために、基準面をある位置に定めて着目する部位を表示する。
- (3) ある官能基に着目し、その官能基周りに想定する基準面の裏表における構造環境の違いを交互に表示して比較する。

化学者は、可視化表示を見ながら、考察に必要な着目する部位や基準となる面を定め、それに関して対象となるオブジェクトを表現させるための操作をおこなう。見たいオブジェクトや視点の角度が極めて明確な状態でこれらの可視化対象を操作する。このような操作は、「どんな風に見えるか様々な視点から様々なオブジェクトを表示させてみる」といったタスクとは根本的に目的が異なる。

これらの観察結果をもとに、拡大表示、正面表示、角度指定正面表示、逆相表示、という四つのオペレーションプリミティブを同定した。図 2 に示す。

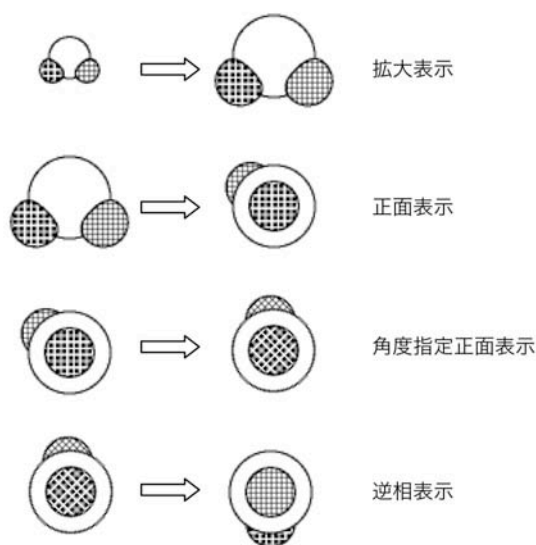


図 2: オペレーションプリミティブ

4 調和性の評価へ向けて

本章では、同定したオペレーションプリミティブに対する、各種入力デバイスの調和性の評価を目的として実施した実験とその結果について述べる。

本研究では、図 3 に示す、下記の7種のデバイスを考慮することとした。

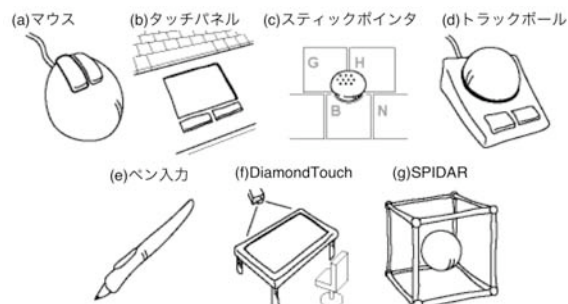


図 3: 調和性評価で使用したデバイス

(a)-(e)のデバイスは、一般的に市販されている入力デバイスである。(a)はマウス、(b)はタッチパネル、(c)はスティックポインタ、(d)はトラックボールである。(e)は、タッチセンサのためのペン入力インターフェースである。(f)は、DiamondTouch である。DiamondTouch は、MERL が研究開発した、水平設置型タッチパネルである [Dietz, Leigh 2001]。上部からのプロジェクションにより可視化表示される。指で盤上をなぞることにより、ペン入力イン

タフェースと同様に機能する。(g)は、東工大精密工学研究所の佐藤・小池研究室で開発されている、SPIDAR と呼ばれる三次元入力デバイスである [金, 洪 et al. 02]。立方体の枠の 8 頂点からモータ制御された糸で中央部に保持されたボールを、上下左右前後と移動させたり、ねじったりすることで、画面上に表示されたオブジェクトを三次元空間で操作することができる。

これら7種のデバイスを用いて、(2)で同定されたオペレーションプリミティブとの調和性を評価することを目的として、5名のユーザによるユーザ実験をおこなった。

実験においては、ソフトウェアインストゥルメントとして、オープンソース三次元ライブラリ Jun が提供するビューアインターフェースを利用した [Aoki, Hayashi et al. 2001]。図 4 に示すような水分子を表示させ、Jun が提供する、回転には直接操作型のインターフェース、拡大には、ウィンドウの右側面に配置されたダイヤル操作のインターフェースを用いた。

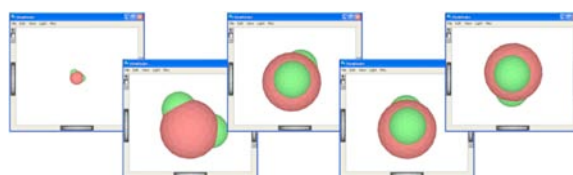


図 4: 調査性評価に用いた可視化ソフトウェアと提供するインストゥルメント

4.1 調査実験の概要

実験に先だて、各実験参加者に、各デバイスへの慣れ、各参加者が認知している各デバイスの一般性、分子操作と各デバイスとの予想される調和性、をあらかじめ調査した。調査の方法は、デバイスの順位づけとした。図 5 に、各参加者が示した順位づけを示す。

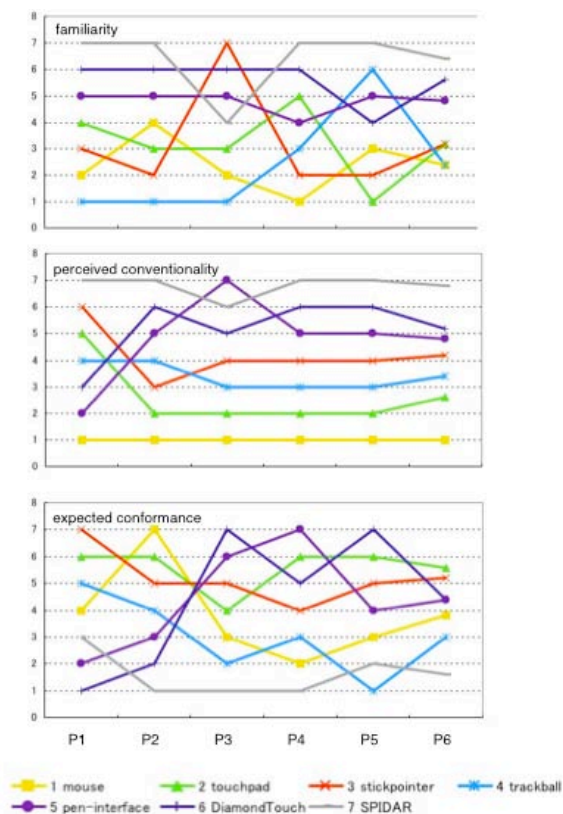


図 5: 各参加者によるデバイスの順位付け

次に、各参加者が慣れていると回答した順序でそれぞれのデバイスを利用して、各参加者に、表 1 に示す順序で水分子のスペースフィルモデルの表示をおこなってもらい、各表示までにかかった時間を計測した。図 6 に実験の様子を示す。これらの操作タスクは、上述したオペレーションプリミティブを包含したものである。

表 1: 操作タスクの順序

T1	ズームインによる拡大表示 (ズームングダイアルの使用)
T2	回転による水素原子のセンタリング (他の水素原子はどの位置でもよい)
T3	回転により水素原子センタリングのまま 下部にもう一つの水素原子を表示-(X)
T4	回転により下部水素原子を中央にセンタリング 上部に先の水素原子を表示-(Y)
T5	(X) 再表示
T6	(Y) 再表示

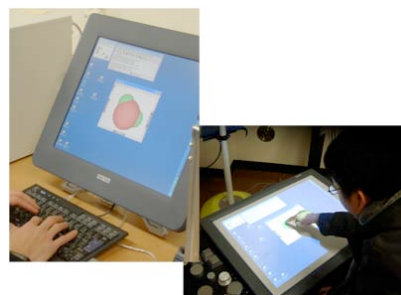


図 6: 調査実験の様子

4.2 調査実験の結果と考察

図 7(a) に、各タスクに対して、すべてのデバイスを利用しておこなうのに要した時間のグラフ、図 7(b)に、各デバイスに対して、すべての操作タスクに要した合計時間のグラフを示す。なお、SPIDAR 利用時には、デバイスの構造上の制約から T1(ズームインタスク)は実施していない。予想された通り、慣れの低い DT や SPIDAR ではタスク遂行に時間がかかっている。操作タスクの中では、回転により水素原子を正面に表示させたまま、もう一方の水素原子を下部に表示するというタスク(T3)で最も時間がかかっている。このタスクは、化学者が分子構造を操作するにあたってはしばしばおこなう操作であるが、一般的なソフトウェアビューアを利用時には、どのようなデバイスを利用してもやりにくいタスクであることがわかる。

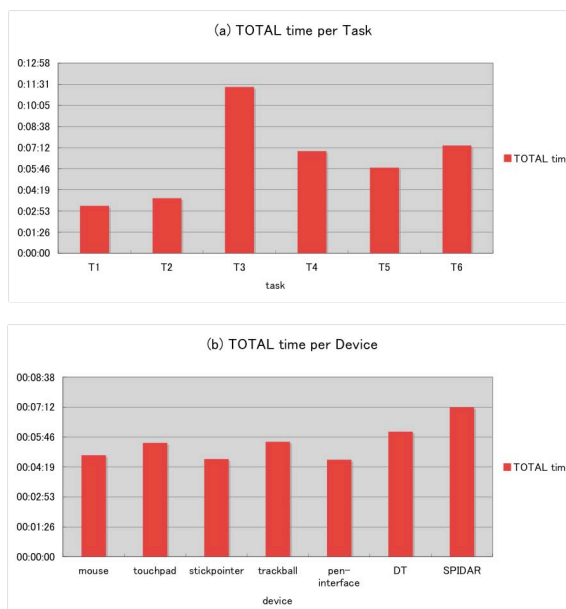


図 7: (a)各タスクについて全デバイスで要した全参加者の合計タイム; (b)各デバイスで全タスクに要した全参加者の合計タイム

次に、この T3 を実行するのに各デバイスでどのくらいの時間がかかっているかを図 8(a)に示す。これによると、全デバイスで全般的に時間がかかっているが、特に SPIDAR において長い時間がかかっている。これは、SPIDAR ではボールが 8 方向から糸により支持されているため、45 度を超えては回転しにくいという特性によるものと考えられる。ところが、図 8(b)に示すように、SPIDAR では、T4 に要する時間が短い。T4 は、位相を変えて表示するというものであり、SPIDAR のボールを保持したまま、手の位置を変えるのみで、元の位置に戻すという作業が行い易いと考えられる。

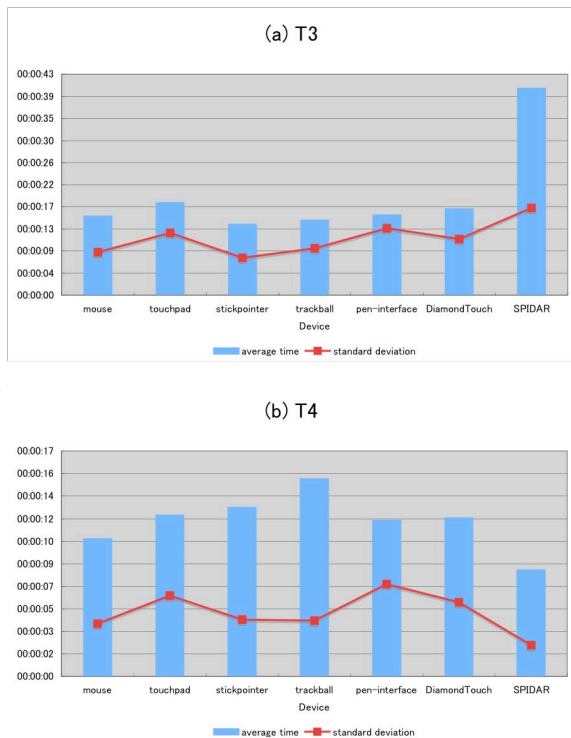


図 8: (a)タスク T3 に各デバイスが要した全参加者の合計タイム; (b)タスク T4 に各デバイスが要した全参加者の合計タイム

なお、その他のタスクにおいて、(a)-(e)の一般的に市販されているデバイス間で要した時間については、統計的に見て有意な差はみられなかった。

次に、実験参加者による、タスクに要した時間の違いを見る。図 9 に示すように、どの参加者も、同様に T3 に時間を要している。ところが、各デバイスで要した時間をみると、図 10 に示すようにばらつきが出る。この結果と、あらかじめ調査した各参加者のデバイスへの慣れの順位付けとの相関を見てみたが、いずれも有意な差はみられなかった。

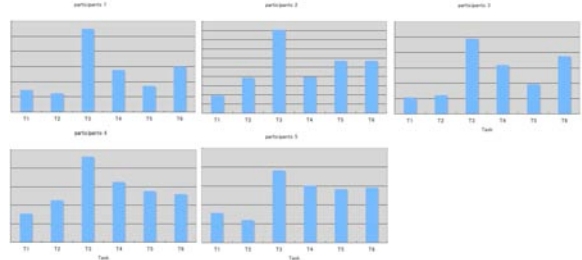


図 9: 各参加者が各タスクに要した時間

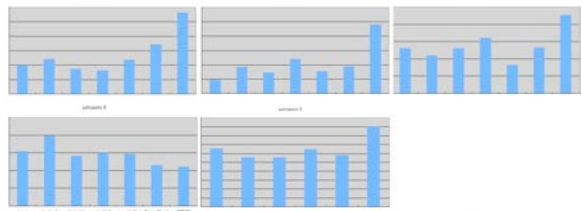


図 10: 各参加者が各デバイスで要した時間

以上の定量的な観察結果のほかに、定性的に観察して得られた観察結果を述べる。これらの観察結果はいずれも、利用するソフトウェアインストールとの関わりが深いと考えられ、今後の研究課題への指針となると考えられる。

参加者は、操作する経路の目安をつけて、その経路をたどって操作するという戦略をとっているように見受けられた。ところが、この経路が必ずしもそのデバイスを利用時に最適な戦略とは限らない。特に、T3 ではこの傾向が顕著に見られた。どのデバイスを用いているかに関わらず、まず、正面に水素原子を表示させ、後から方向を調整しようとする様子がしばしば観察された。ところが、特に SPIDAR といった、目的とする表示状態への経路が影響してくるようなデバイスにおいては、むしろ、最初から見たい表示角度を目指す戦略で表示させる方が適している。デバイスへの習熟度にも依るとは考えられるが、画面から得られるフィードバックとデバイスの操作の関係について考慮する必要があり、この点は、どのようなソフトウェアインストールを利用するかにかかわる点である。

また、今回利用したソフトウェアインストールでは、回転させた後のマウスカーソルの動きを加速度として認識する機能が実装されている。マウスをリリースしても回転させ続けることができるこの操作は、参加者が意図しないのに起動されてしまう場合があった。特にこの加速度がつきやすいデバイスとしては、マウス、スティックポインタ、トラックボールなどである。逆に、ペン入力や、DiamondTouch といった、ディスプレイ画面を直接的に操作するようなデバイスでは、そのような意図しない加

速度操作は見られなかった。しかしながら、実際に分子構造を操作する際には、こうした加速度的機能が必要とされる場面は限られていることから、調査に用いるソフトウェアインストルメントの機能についても今後吟味する必要がある。

5 おわりに

本稿では、化学者が、三次元分子モデルの可視化表現に対しておこなうオペレーションプリミティブと、デバイスとの調和性について調査をおこなった。

それぞれのオペレーションプリミティブについて最適なデバイスが見つかったとしても、異なるデバイスをそれぞれのオペレーションについて用いることは実際ではなく、むしろ思考を阻害する。そこで、各オペレーションプリミティブに適したデバイスを理解するとともに、オペレーション全般を通して利用できる1種類のデバイスを同定する必要がある。

一方、本稿ではまだ触れていないが、ソフトウェアインストルメントとの調和性を見る必要がある。それぞれのオペレーションプリミティブに対して、異なるソフトウェアインストルメントが適しているという可能性も考えられる。これも同様に、異なる GUI をそれぞれ用意することはかえってユーザの操作感を損なうものとなる。そのため、一種類に同定する必要がある。

1章で述べたように、本稿で報告した調和性の実験は、これらのデザインをおこなう際の優先順位づけをおこなう際の目安として使用すべきデータとしての利用を目的としたものである。今後は、図1に示す枠組みに基づいて、ソフトウェアインストルメントのプリミティブを構築し、インストルメントとオペレーションプリミティブとの調和性、インストルメントとデバイスの調和性を評価する予定である。さらに、三次元分子構造について思考する際の主要手段であるプラスチック分子模型との相違にも着目し、操作プリミティブに適したインタラクションデザインを進める予定である。

謝辞

調査実験にご協力頂いた参加者の方々に感謝する。本研究は H16 国立情報学研究所共同研究および文部科学省科学研究費基盤研究(A)(1)16200008 のもとに実施されたものである。

参考文献

1. Aoki, A., Hayashi, K., Kishida, K., Nakakoji, K., Nisinaka, Y., Reeves, B., Takashima, A., Yamamoto,

Y., A Case Study of the Evolution of Jun: an Object-Oriented Open-Source 3D Multimedia Library, Proceedings of International Conference on Software Engineering (ICSE2001), Toronto, CA., IEEE Computer Society, Los Alamos, CA., pp.524-533, May, 2001.

2. Beaudouin-Lafon, M., Instrumental Interaction: An Interaction Model for Designing Post-WIMP User Interfaces, Proceedings of Human Factors in Computing Systems (CHI2000), ACM Press, New York, NY., pp. 446-453, 2000.

3. Beaudouin-Lafon, M., Designing interaction, not interfaces, Proceedings of the working conference on Advanced visual interfaces, May 25-28, Gallipoli, Italy, 2004.

4. Dietz, P., Leigh, D., DiamondTouch: A Multi-User Touch Technology, Proceedings of UIST 2001, ACM Press, New York, NY., pp.219-226, 2001.

5. 金載然, 洪性寛, 佐藤誠, 小池康晴, SPIDAR を用いた size-weight illusion の検証, 日本バーチャルリアリティ学会論文誌, vol.7, no.3, pp.347-345, 2002.

6. 中小路久美代, 佐藤寛子, 山本恭裕, 青木淳, 浅岡浩子, 分子反応予測のための可視化におけるインタラクションデザイン, 情報処理学会ヒューマンインタフェース研究会, IPSJ-SIGHI-106, pp.79-86, 2003.

7. 中小路久美代, 山本恭裕, 創造的情報創出のためのナレッジインタラクションデザイン, 人工知能学会論文誌, Vol.19, No.2, pp.154-165, March, 2004